Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0825U003665

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 02-09-2025

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Іленков Ілля-Микола Анджейович
2. Illia-Mykola A. Ilenkov

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-7950-7220

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 104

Назва наукової спеціальності: Фізика та астрономія

Галузь / галузі знань: природничі науки

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Доктор філософії зі спеціальності «Фізика та астрономія»

Дата захисту: 13-10-2025

Спеціальність за освітою: Прикладна фізика

Місце роботи здобувача:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): PhD 10839

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем імені І. Р. Юхновського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем імені І. Р. Юхновського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 29.17, 28.17.15, 29.19.03

Тема дисертації:

1. Колективні збудження в рідинах з асоціатами на основі першопринципного моделювання

2. Collective excitations in liquids with associates based on ab initio simulations

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена дослідженню колективних збуджень в рідинах з асоціатами із використанням методів комп'ютерного моделювання ab initio молекулярної динаміки (AIMD) та теоретичного аналізу на основі підходу узагальнених колективних мод в рамках узагальненої гідродинаміки. Об'єктами досліджень виступали розплав стибію та флюїд водню за високих тисків. Знаходження власних значень та векторів узагальненої гідродинамічної матриці, що еквівалентно розв'язанню узагальненого рівняння Ланжевена в матричній формі, дає теоретичний опис залежних від часу кореляцій густин та потоків частинок у рідинах. Цей підхід дозволяє встановити природу колективних збуджень та знайти поведінку колективних мод поза межами гідродинамічної області. Було проведено аналіз структурних та динамічних особливостей розплаву стибію. Отримано радіальну функцію розподілу частинок, особливістю якої плече в межах першої координаційної сфери. За результатами дослідження часової еволюції відстаней між

найближчими сусідами було встановлено, що зазначене плече відповідає положенням квазі-зв'язаних пар атомів. Застосовано п'яти-змінну термо-в'язкопружну модель, що вдало відтворювала кореляційні функції, отримані з першопринципного комп'ютерного моделювання AIMD. Показано, що одна з двох спостережуваних поширювальних мод характеризується розширеною пласкою ділянкою у дисперсії колективних збуджень, яка добре узгоджується з результатами моделювань AIMD. Додатково встановлено, що колективні збудження квазі-зв'язаних пар мають пласку дисперсію для усіх досліджуваних значень хвилевого числа k, що не є характерним для інших виявлених мод. Досліджено колективну динаміку молекулярного флюїду водню. Застосування п'яти змінної термо-в'язкопружної моделі узагальненої гідродинаміки здійснено для відтворення чотирьох колективних часових кореляційних функцій, отриманих з моделювань AIMD. Встановлено, що застосування уявної частини функції відгуку густини та кореляційної функції похідних поздовжнього потоку для знаходження невідомих статичних кореляторів та кореляційних часів в узагальненій гідродинамічній матриці добре відтворює спектральні характеристики функцій поздовжнього потоку, а також дисперсію колективних збуджень. Показано довгохвильові асимптоти ~k^2 для статичних кореляторів часових похідних поздовжнього та поперечного потоків. Підтверджено правильну гідродинамічну поведінку дисперсії та загасання для комплексних власних значень отриманих з методу узагальнених колективних мод у довгохвильовій області. Проведено аналіз структурних та динамічних особливостей флюїду водню в області індукованого тиском переходу від молекулярного до атомарного стану. Встановлено дисперсію колективних збуджень для ряду густин за температури 2500 K. Отримана залежність від густини адіабатичної та високочастотної швидкості поширення звуку містить плато в області переходу від молекулярного до атомарного станів. Показано, що п'ятизмінна термо-в'язкопружна модель вдало відтворює часові кореляційні функції, одержані з AIMD, для чисто атомарного флюїду водню. Запропоновано використання моделі хімічно реакційних розчинів та способу розділення внесків до часових кореляційних функцій через парціальні компоненти молекулярної та атомарної підсистем.

2. The thesis is devoted to the investigation of collective excitations in liquids with associates using ab initio molecular dynamics (AIMD) simulations and theoretical analysis within the framework of generalized hydrodynamics based on the approach of generalized collective modes. The systems of interest in this study include liquid antimony and hydrogen fluid under high-pressure. The estimation of eigenvalues and eigenvectors of the generalized hydrodynamic matrix, which is equivalent to solving the generalized Langevin equation in matrix form, provides a theoretical description of the time-dependent particle density and current correlation functions in liquids. This approach allows for the better insight in nature of collective excitations, as well as finding the behavior of collective modes beyond the hydrodynamic regime. An analysis of the structural and dynamical properties of liquid antimony was carried out. The radial distribution function of particles was obtained, characterized by a shoulder within the first coordination shell. Based on the time evolution of the distances between nearest neighbors, it was established that the shoulder is due to the preferred positions of quasi-bound atomic pairs. A five-variable thermo-viscoelastic model was applied that successfully reproduced the correlation functions obtained within the first-principles simulations. It was shown that one of the two observed propagating modes exhibits an extended flat region in the dispersion of collective excitations, which agrees with the AIMD results. Additionally, it was found that the collective excitations of quasi-bound pairs exhibit a flat dispersion for all studied wave-numbers k, that was not specific for the other modes. The collective dynamics of molecular hydrogen fluid was investigated. The five-variable thermo-viscoelastic model of generalized hydrodynamics was employed to reproduce four collective time correlation functions derived from AIMD simulations. It was established that using the imaginary part of the density response function and the correlation function of the time derivatives of the longitudinal current to determine the unknown static correlators and correlation times in the generalized hydrodynamic matrix accurately reproduces spectral properties of the longitudinal current correlation functions along with the dispersion of collective excitations. The long-wavelength asymptotes ~k^2 were obtained for the static correlators of the time derivatives of the longitudinal and transverse currents. The correct hydrodynamic behavior of the dispersion and damping of the complex eigenvalues, obtained from the generalized collective modes approach, was confirmed in the long-wavelength regime. An analysis of the structural and

dynamical features of the hydrogen fluid in the pressure-induced transition region from the molecular to the atomic state was performed. The dispersion of collective excitations was determined for a range of densities at a temperature of 2500 K. The obtained density dependence of the adiabatic and high-frequency sound velocities exhibits a plateau in the transition region from molecular to atomic state. It was shown that the five-variable thermo-viscoelastic model accurately reproduces the time correlation functions obtained from AIMD simulations for purely atomic hydrogen fluid. The use of chemically reactive mixture model and the decomposition of the time correlation function contributions via the partial components of molecular and atomic subsystems was proposed.

Державний реєстраційний номер ДіР: № 0120U104922; № 0121U111728; № 0123U103903

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Не застосовується

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- Ilenkov I.-M., Bryk T. Ab initio simulation study of collective excitations in a molecular Hydrogen fluid // Journal of Physical Studies –– 2025. –– Vol. 25, no. 2. –– P. 2601
- T. Bryk, I.-M. Ilenkov, A. P. Seitsonen. Quasi-bound atoms in collective dynamics of liquid Sb // Journal of Physics: Condensed Matter –– 2023. –– Vol. 35 –– 154003

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Впровадження не планується

Зв'язок з науковими темами: № 0124U002074

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Брик Тарас Михайлович

2. Taras M. Bryk

Кваліфікація: д. ф.-м. н., професор, член-кор. НАН України, 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-4360-0634

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем імені І. Р. Юхновського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Костробій Петро Петрович

2. Petro P. Kostrobii

Кваліфікація: д. ф.-м. н., професор, 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-4428-1647

Додаткова інформація:
;https://scholar.google.com.ua/citations?user=hUnTnF0AAAAJ&hl=uk;https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6507408358

Повне найменування юридичної особи: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. Степана Бандери, Львів, 79013, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Бовгира Олег Вікторович

2. Oleh V. Bovhyra

Кваліфікація: к. ф.-м. н., доц., 01.04.10

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-9844-6868

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Щур Ярослав Йосифович

2. Yaroslav Y. Shchur

Кваліфікація: д. ф.-м. н., старший науковий співробітник, 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-9662-6304

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 15072081600; Web of Science Researcher ID: KEJ-4339-2024; https://scholar.google.com/citations?user=jNml_1IAAAAJ

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем імені І. Р. Юхновського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Пацаган Тарас Миколайович

2. Taras M. Patsahan

Кваліфікація: д. ф.-м. н., с.д., 01.04.24

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-7870-2219

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 7801655813; Web of Science Researcher ID: V-8175-2017; https://scholar.google.com/citations?hl=uk&user=xX7KLoEAAAAJ

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем імені І. Р. Юхновського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради — Мриглод Ігор Миронович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні — Мриглод Ігор Миронович

Відповідальний за підготовку облікових документів — Іленков Ілля-Микола Анджейович

Реєстратор Юрченко Тетяна Анатоліївна

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Тетяна Анатоліївна